

# Perovskitas como alternativa en celdas fotovoltaicas

Montoya Moreno Arnulfo\*, Olvera Neria Óscar

Universidad Autónoma Metropolitana, Área de Física Atómica Molecular Aplicada (FAMA), CBI, Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Ciudad de México, 02200, México.

\*Autor para correspondencia: [arnulfo.montoya@gmail.com](mailto:arnulfo.montoya@gmail.com)

**Recibido:**  
28/febrero/2020

**Aceptado:**  
30/octubre/2020

**Palabras clave:**  
Perovskitas,  
fotovoltaicas,  
eficiencia

**Keywords:**  
Perovskites,  
photovoltaic,  
efficiency

## RESUMEN

La energía solar es una fuente de energía renovable, sustentable y limpia. Las celdas fotovoltaicas de perovskita tienen ventajas sobre las de silicio, entre ellas, se pueden obtener en condiciones ambientales. Las tipo  $ABX_3$  tienen una estructura cúbica haluro órgano-metálica. La empleada como el modelo es la de yoduro de plomo de metilamonio,  $CH_3NH_3PbI_3$ , si esta es fabricada y distribuye masivamente, el problema es la recuperación del plomo, y el cómo evitar la contaminación de los mantos acuíferos. Se realizó un estudio teórico para la sustitución del plomo implementando criterios de estabilidad a partir de las propiedades físico-químicas y opto-electrónicas, con dos objetivos principales: eliminar o disminuir la toxicidad y mejorar la estabilidad del sistema. Se determinó las estructuras electrónicas de 121 perovskitas y solo 11 favorecen al proceso de absorción de fotones en la región de luz visible.

## ABSTRACT

Solar energy is a renewable, sustainable, and clean energy source. Perovskite photovoltaic cells have advantages over silicon cells; among them, they can be obtained at room temperature. The  $ABX_3$  type has an organ-metal halide cubic structure. The one used as the model is that of methylammonium lead iodide,  $CH_3NH_3PbI_3$ , if it is manufactured and distributed massively, the problem is the recovery of lead, and how to avoid contamination of the aquifers. A theoretical study for lead substitution was carried out, implementing stability criteria based on physical-chemical and optoelectronic properties, with two main objectives: to eliminate or reduce toxicity and improve the stability of the system. The electronic structures of 121 perovskites were determined and only 11 favor the process of photon absorption in the region of visible light.

## Introducción

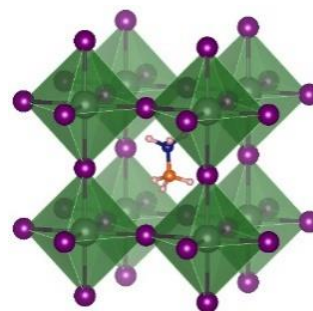
Para satisfacer la demanda energética, la energía solar representa una fuente sustentable, renovable, y limpia. Requiere de dispositivos que transformen la energía de los fotones incidentes a corriente eléctrica. Estos son celdas fotovoltaicas (CFV) que son uno de los mejores avances tecnológicos a causa de su desempeño logrado de manera eficiente (Han, 2017). Entre ellas, la CFV de silicio tiene una vida útil cercana a 25 años, esta es investigada desde el año 1939. Actualmente esta celda tiene una eficiencia de conversión energética (ECE) del 26.7% (Poortmans and Arkhipov, 2006). Su fabricación requiere procesos de alta pureza que implica laboratorios de alta tecnología aumentando su costo. También, tiene una brecha de energía prohibida ( $E_{\text{gap}}$ ) de 1.18 eV asociada a una longitud de onda ( $\lambda$ ) de 900 nm. La principal deficiencia es que no considera la región de luz visible localizada en el intervalo de 380 a 780 nm. Para compensar la deficiencia de la CFV de silicio se propone el uso de las celdas fotovoltaicas de perovskita (CFVP) (Blank et al., 2018; Blakers et al., 2013; Green et al., 2019).

La CFVP se puede construir en condiciones ambientales, aunque su estabilidad representa un desafío. La celda está constituida de varias capas uniformes y lineales, similar a un sándwich. En la parte central tiene la capa activa llamada perovskita. En los extremos de la parte activa se tiene dos bandas, una es transportadora de electrones, y otra es transportadora de huecos. En los bordes se localizan dos electrodos conductores metálicos. Esta celda se distingue por sus propiedades físicas: delgada, transparente, flexible y ligera. La mejor hasta el día de hoy conforme a la ECE es del 22.1% y una  $E_{\text{gap}}$  de 1.55 eV (Tai et al., 2019; Boix et al., 2015).

La parte activa es la perovskita, es híbrida haluro órgano-metálica, la que favorece el fenómeno de adsorción y es tomada como el modelo es la perovskita MAPI = yoduro de plomo de metilamonio =  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)^+\text{Pb}^{2+}\text{I}_3^-$ , ver *Figura 1*. La fase cúbica se constituye de tres elementos en diferentes posiciones, uno es el catión orgánico  $A^+$  ( $(\text{CH}_3\text{NH}_3)^+$  = metilamonio = MA) en la posición central con coordinación 12, el otro es el catión divalente metálico  $B^{2+}$  ( $\text{Pb}^{2+}$ ) en los vértices del cubo con coordinación 6, y por último, el anión o haluro  $X^-$  ( $\text{I}^-$ ) en las aristas del cubo. En su interior, los cationes y los haluros forman geometrías cubo-octaédricas y octaedros, respectivamente (Graetzel, 2014; Kieslich et al., 2015).

La perovskita MAPI de la figura 1 presenta: una alta ECE, una alta movilidad de los portadores de carga fotogenerados (electrones,  $e^-$  y huecos,  $h^+$ ) y el fenómeno de transporte de carga ambipolar al considerar a los  $e^-$  y

$h^+$ , de manera simultánea. Es semiconductor con una  $E_{\text{gap}}$  directa asociada a la  $\lambda$  de un amplio espectro de absorción principalmente en la región de luz visible. También, tiene una alta movilidad de los portadores de carga, y una baja energía del excitón. Es necesario que experimentalmente puedan sintetizarse perovskitas con el propósito de obtener valores de  $E_{\text{gap}}$  específicas asociadas a diferentes  $\lambda$ , modificando la formación y la estabilidad. Cualidades que las hacen idóneas para diferentes aplicaciones, entre ellas: el uso de CFVP en dispositivos emisores de luz, láseres, fotocatalizadores, y transistores (Yin, 2014; Song et al., 2015; Ye et al., 2016).



**Figura 1.** Estructura en fase cubica de la perovskita MAPI.

Al irradiar un material los átomos interaccionan con la radiación incidente, al absorber un fotón provoca la excitación de un electrón del estado fundamental al estado excitado, fenómeno conocido como excitación o transición electrónica. En el que, el electrón puede promoverse a diferentes niveles a causa de la diferencia de energía, ya que existen múltiples niveles electrónicos. La absorción en cada material tiene una  $\lambda$  característica. Para la espectroscopia UV-vis se estudia la interacción entre la materia y la radiación electromagnética para valores de  $\lambda$  en el intervalo de 380 nm a 780 nm.

## Metodología

Se implementó la sustitución de los tres elementos principales de la perovskita MAPI aplicando criterios geométricos y de la formación de perovskitas. Con dos líneas principales de investigación, una es sustituir el plomo para reducir o eliminar la toxicidad, y la otra, es mejorar la estabilidad. La sustitución se realizó: primero, el catión monovalente  $A^+$  por 18 cationes, son:  $[\text{NH}_4]^+$ ,  $[\text{NH}_3\text{OH}]^+$ ,  $[\text{NH}_3\text{NH}_2]^+$ ,  $[(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2]^+$ ,  $[\text{CH}(\text{NH}_2)_2]^+$ ,  $[\text{C}_3\text{N}_2\text{H}_5]^+$ ,  $[(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2]^+$ ,  $[\text{NC}_4\text{H}_8]^+$ ,  $[(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{NH}_3]^+$ ,  $[(\text{NH}_2)_3\text{C}]^+$ ,  $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]^+$ ,  $[(\text{HN})(\text{CH}_2)_3\text{S}]^+$ ,  $[\text{C}_7\text{H}_7]^+$ ,  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{MA}^+$ ,  $\text{FA}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ , y  $\text{K}^+$ . Después, el catión divalente  $B^{2+}$  por 21 cationes, son:  $\text{Be}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Pd}^{2+}$ ,  $\text{Pt}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Hg}^{2+}$ ,  $\text{Ge}^{2+}$ ,  $\text{Sn}^{2+}$ ,  $\text{Eu}^{2+}$ ,  $\text{Tm}^{2+}$ , y  $\text{Yb}^{2+}$ . Y finalmente, la tercera sustitución el anión  $X^-$  por cada uno de cuatro elementos, siguientes (haluros):  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ , y  $\text{I}^-$ , pertenecen al grupo VIIA.

Se utilizaron criterios estrictos de aceptación con el fin de garantizar la formación de perovskitas considerando la simetría y el tamaño de los iones. El primero, es el *factor de tolerancia de Goldschmidt* ( $t$ ) que representa la razón entre dos distancias, la localizada entre el catión  $A^+$  al anión  $X^-$  ( $r_{Aefe} + r_X$ ) y la localizada entre los cationes  $A^+$  y  $B^{2+}$  ( $\sqrt{2}(r_X + r_B)$ ), factor adimensional descrita en la siguiente ecuación:

$$t = \frac{(r_{Aefe} + r_X)}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} \quad (1)$$

donde  $r_{Aefe}$  es el radio efectivo iónico de Shannon del catión monovalente  $A^+$ .  $r_B$  es el radio del catión divalente metálico  $B^{2+}$ . Y finalmente,  $r_X$  es el radio del anión  $X^-$  del haluro (Goldschmidt, 1926; Suess, 1988).

A partir de los resultados experimentales logrados al formar perovskitas tipo  $ABX_3$ , se observó que la estabilidad puede ser descrita a partir de dos factores principalmente: el geométrico y las repulsiones electrostáticas entre los iones. Cuyo fin es el ahorro de recursos económicos, como es el tiempo de cómputo y obtener el número de combinaciones posibles para formar las perovskitas, que en su interior una mínima deformación modifica el número de coordinación (Wang, 2016; Saliba et al., 2016). Como es el caso de los octaedros, en el que existe una mayor interacción electrostática consecuencia de una menor longitud de enlace entre el catión divalente  $B^{2+}$  y el anión  $X^-$ . Restricción necesaria que propone el criterio de aceptación llamado *factor octaédrico* ( $\mu$ ) que es la razón  $\frac{r_B}{r_X}$ , entre los radios del catión  $B^+$  ( $r_B$ ) y del anión  $X^-$  ( $r_X$ ). Además, se incluye para la formación otro enlace principal que complementa a las perovskitas, llamado *factor cubo-octaédrico o factor de celda* ( $\rho$ ) con la relación  $\frac{r_A}{r_X}$ , de los radios del catión  $A^+$  ( $r_A$ ) y del anión  $X^-$  ( $r_X$ ), respectivamente (Kieslich et al., 2015; Travis et al., 2016; Becker et al., 2017).

Con los criterios de aceptación se programó un script en MatLab a partir de las propiedades fisicoquímicas, con el fin de localizar la región que favorece las mejores combinaciones para formar perovskitas en ausencia de plomo. El modelo incorpora las características necesarias, incluye: los efectos físicos, la familia de los elementos, la toxicidad, los estados de valencia, las propiedades geométricas, y la interacción electrostática de los iones.

Con los resultados obtenidos de 1512 combinaciones solo 121 forman perovskitas, utilizadas al implementar cálculos con el propósito de determinar las mejores que favorecen el fenómeno de adsorción en la región de luz

visible. Se utilizó la teoría de los funcionales de la densidad, DFT (Fiolhais et al., 2003; Perdew et al., 1996; Fitzgerald and Andzelm, 1991), el código VASP5.4.1 (Sun et al., 2003), y el método de onda proyectada aumentada (PAW) que considera a los electrones del core y a los de valencia. Para ello, se utilizó el funcional de intercambio y correlación Perdew-Burke-Ernzerhof para sólidos (PBEsol), con la energía de corte de 500 eV, la malla de puntos  $k$  fue de  $6 \times 6 \times 6$  en el espacio recíproco, y los criterios de convergencia de paro utilizados para las fuerzas fue de  $1 \times 10^{-2}$  eV/Å y para la energía  $1 \times 10^{-5}$  eV.

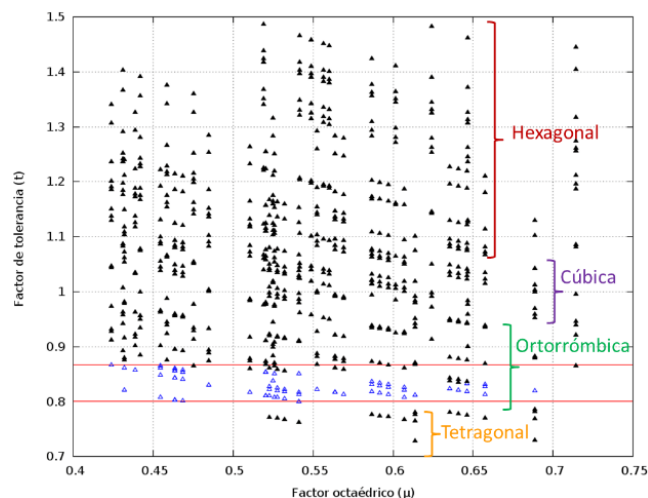
Se puede estimar las frecuencias vibracionales armónicas entre los estados estacionarios. En él, la magnitud es la fracción imaginaria de la función dieléctrica que depende de la frecuencia ( $\epsilon_2(\omega)$ ) recíproco al coeficiente de extinción  $k(\omega)$  de la siguiente manera:  $k(\omega) = \sqrt{\epsilon_2(\omega)}$ . Con este fin se determinó el espectro característico de 36 perovskitas que favorecen el proceso de absorción con el funcional PBEsol cuyo fin es reproducir las vibraciones experimentales. Localizadas en el intervalo de valores de  $E_{gap}$  de 0.1 eV a 2.00 eV.

## Resultados y discusión

Al implementar los criterios se localizó la región que favorece la formación de octaedros tipo  $BX_6$ , y perovskitas, de manera simultánea. No significa que todas las combinaciones forman perovskitas solo que existe una región que favorece esta formación. Además, es necesario identificar otra región que favorece la formación de octaedros, indispensable en la formación de perovskitas. Los octaedros se modifican a causa de tres fenómenos principalmente: el desplazamiento del catión divalente, la rotación o giro de octaedros, y la distorsión geométrica de los haluros.

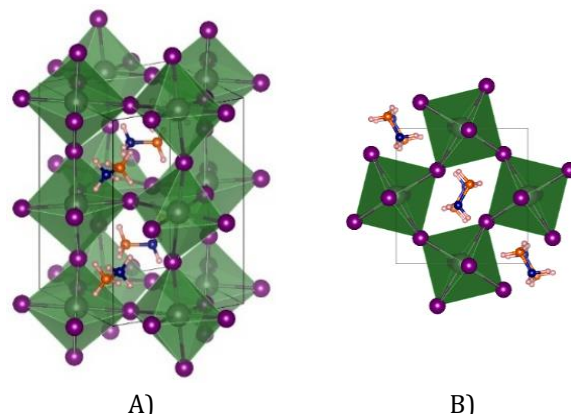
En la Figura 2 se muestra el diagrama del factor octaédrico ( $\mu$ ) versus el factor de tolerancia de Goldschmidt ( $t$ ). Se observa en triángulos de color azul combinaciones que forman perovskitas, con valores de  $t$  que coinciden con la formación de octaedros y perovskitas de manera simultánea, localizados en:  $0.800 \leq t \leq 0.862$  y  $0.4235 \leq \mu$  (Travis et al., 2016). Se distingue valores de  $t$  correspondiente a fenómenos que favorecen a la formación de diferentes regiones y fases. Las perovskitas tienen tres fases en función de la temperatura ( $T$ ): Cúbica al someter el material a tratamientos térmicos a  $T$  mayores a 327 K, tetragonal en el intervalo  $327 \text{ K} > T > 165 \text{ K}$ , y ortorrómbica con  $T$  menores a 165 K. La  $E_{gap}$  varía en función de la fase, aumenta al disminuir la simetría, resultado de la relajación e inclinación de octaedros (Wang et al., 2016). Para valores cercanos a 1.0 favorece a estructuras cúbicas. Cuando  $t$  es menor a 1.0 principalmente son

estructuras ortorrómbicas, en las que se comprimen los enlaces entre  $B^{2+}$  con  $X^-$ , y aumentan los enlaces entre  $A^+$  con  $X^-$ . Como consecuencia del tamaño de los iones asociado a la rotación de los octaedros, con el fin de relajar las tensiones y mejorar la estabilidad. De manera opuesta, con valores mayores a 1.0 los enlaces entre  $B^{2+}$  con  $X^-$  aumentan, y los enlaces entre  $A^+$  con  $X^-$  disminuyen, favoreciendo estructuras hexagonales. Los octaedros no limitan el tamaño del catión de  $A^+$ , sin embargo, favorecen a la formación de perovskitas tipo  $ABX_3$ .



**Figura 2.** Formación de perovskitas tipo  $ABX_3$ , factor octaédrico ( $\mu$ ) versus factor de tolerancia de Goldschmidt ( $t$ ).

Para una correcta interpretación que describa a los electrones y a sus interacciones, se utilizó la teoría de la estructura de bandas electrónicas. La cual asume que todos los electrones de valencia son compartidos por todos los átomos del sistema. Con este propósito se estudió la estructura de mínima energía implementando la fase ortorrómbica con distorsión de octaedros. La estructura utilizada pertenece al grupo espacial  $Pnma$  (núm. 62), véase las figuras 3a y 3b, y 216 vectores  $k$  en la zona irreducible, que es el utilizado teóricamente Martins Troullier para el estudio de la perovskita de MAPI obtenida experimentalmente.



**Figura 3.** Estructura de la perovskita MAPI en fase ortorrómbica. A) Vista lateral, y B) vista superior.

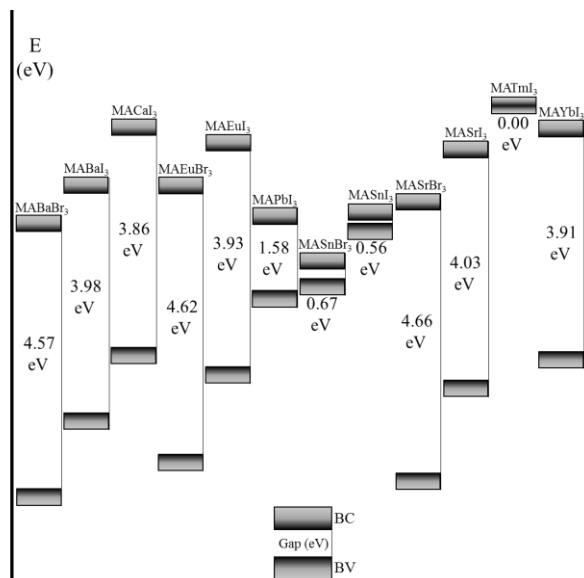
Los electrones de valencia son:  $6s^2 6p^2$ ,  $5s^2 5p^5$ ,  $2s^2 2p^2$ ,  $2s^2 2p^3$  y  $1s$ , para el Pb, el I, el C, el N y el H, respectivamente. Los parámetros de red iniciales de la perovskita MAPI, son:  $8.8362 \text{ \AA}$ ,  $12.5804 \text{ \AA}$  y  $8.5551 \text{ \AA}$ , tal que los vectores  $|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \neq |\vec{c}|$  y los ángulos  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , y un volumen inicial ( $V_i$ ) de  $951.01 \text{ \AA}^3$ . Se tienen 48 átomos, con doce octaedros y cuatro cationes monovalentes  $A^+$ . El volumen de la celda disminuye después de la relajación, para concluir con un volumen final de  $901.31 \text{ \AA}^3$ , que corresponde a los parámetros de red  $|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \neq |\vec{c}|$ , con  $|\vec{a}| = 8.6182 \text{ \AA}$ ,  $|\vec{b}| = 12.4017 \text{ \AA}$ ,  $|\vec{c}| = 8.4329 \text{ \AA}$  y a los ángulos de  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ .

Se distingue el modelo de perovskitas tipo  $ABX_3$  como un sistema flexible, en la que cada combinación tiene una  $E_{\text{gap}}$  única asociada a la  $\lambda$  específica. Es posible localizar perovskitas que favorecen al proceso de absorción en diferentes regiones de luz (infrarrojo, visible, y ultravioleta). Para ello, se sabe de la CFV de silicio tiene una brecha de  $1.18 \text{ eV}$  en la región infrarroja, y la perovskita MAPI una  $E_{\text{gap}}$  de  $1.58 \text{ eV}$  en la región visible. Nuestro objeto de estudio es el fenómeno de absorción en la región de luz visible. De las observaciones de Federico Brivio et al. describe que las orientaciones de los cationes orgánicos modifican la constante dieléctrica y la  $E_{\text{gap}}$ . Se construyó 121 perovskitas en las mismas condiciones que implementa Martins Troullier. Los cationes monovalentes se insertaron en la fase ortorrómbica con distorsión de octaedros y simetría  $Pnma$ , en la estructura publicada por Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) número 967756. Los rayos X no son capaces de resolver las posiciones de los hidrógenos por su baja densidad electrónica. Después de la optimización de las 121 perovskitas, se observan brechas de energía que suponen perovskitas que se comportan como aislantes, semiconductores y metálicas. Las aislantes superan las brechas de  $3.5 \text{ eV}$ , las semiconductoras están en el intervalo de  $0.1 \text{ eV}$  a  $3.5 \text{ eV}$ , y la ausencia de brechas supone perovskitas metálicas.



Las energías totales son resultado de cálculos teóricos con DFT utilizando el funcional PBEsol de los orbitales implicados principalmente en las transiciones electrónicas que permiten representar diagramas de niveles energéticos. En la figura 4 se muestra el esquema de los niveles de energía de perovskitas con el catión monovalente MA. La más estable es MABaBr<sub>3</sub> y la peor es MATlI<sub>3</sub>. Con tres idóneas: MAPbI<sub>3</sub>, MASnBr<sub>3</sub>, y MASnI<sub>3</sub>.

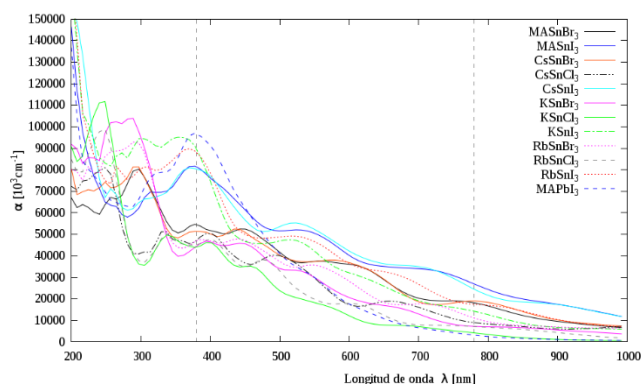
Para comparar propiedades de datos teóricos y experimentales, se determinó el espectro UV-Vis, y se observó que 15 perovskitas tienen  $E_{\text{gap}}$  en el intervalo de 0.52 eV a 1.46 eV que favorece la absorción de fotones en la región luz visible. Se pueden caracterizar materiales conforme a la  $\lambda$  de la absorción de mayor intensidad. En la Figura 5 se muestra la gráfica de los espectros UV-Vis,  $\lambda$  [nm] versus adsorción [ $10^3 \text{cm}^{-1} \text{eV}$ ]. Se describe las estructuras en sustitución del catión monovalente. Para facilitar el mecanismo de comparación entre estas perovskitas a partir del área bajo la curva del perfil definido por cada espectro. Se muestra la  $\lambda$  en el intervalo de 200 nm a 1000 nm en tres regiones de luz: el infrarrojo a mayor a 780 nm, el visible entre 780 nm a 380 nm, y el ultravioleta para valores menores de 380 nm, respectivamente.



**Figura 4.** Diagrama de niveles energéticos de perovskitas tipo ABX<sub>3</sub> con MA en el catión A.

Destaca la perovskita MAPI en líneas punteadas moradas con cuatro picos, tres en la región ultravioleta y una en la región visible, con valores de  $\lambda$  de 231 nm, 323 nm, 378 nm, y 550 nm. Se muestran 11 perovskitas que favorecen el fenómeno de adsorción en la región de luz UV-Vis. En esta ocasión, solo se describen las tres mejores. El CsSnI<sub>3</sub> tiene seis bandas intensas: tres en la región ultravioleta a 264 nm, 305 nm y 372 nm; dos en la región visible a 532 nm y 715 nm. El RbSnI<sub>3</sub> tiene seis bandas intensas: tres en la región ultravioleta a 265 nm, 307 nm y 372 nm; dos en la región visible a 525 nm y 665 nm, y una en la región infrarroja a 820 nm, ver figura 5.

En la tabla 1 se muestran los valores del factor de tolerancia de Goldschmidt ( $t$ ), el factor octaédrico ( $\mu$ ), el factor cubo-octaedro ( $\rho$ ), y las  $E_{\text{gap}}$ , para las mejores 11 perovskitas. También, se presentan algunos valores actuales de la  $E_{\text{gap}}$  localizados teóricamente por Körbel et al. con el funcional HSE (Körbel et al. 2016).



**Figura 5.** Espectro UV-Vis de perovskitas tipo ABX<sub>3</sub>.

**Tabla 1.** Valores del factor de tolerancia de Goldschmidt ( $t$ ), factor octaédrico ( $\mu$ ), el factor cubo-octaedro ( $\rho$ ), y brechas de energía ( $E_{\text{gap}}$ ) de 15 perovskitas tipo ABX<sub>3</sub>.

ABX <sub>3</sub>	$t$	$\mu$	$\rho$	$E_{\text{gap}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV) HSE
CsSnBr <sub>3</sub>	0.97	0.42	0.42	0.70	-
CsSnCl <sub>3</sub>	0.88	0.63	0.63	0.87	1.57
CsSnI <sub>3</sub>	0.86	0.52	0.52	0.51	0.85
RbSnBr <sub>3</sub>	0.83	0.58	0.58	0.86	1.10
RbSnCl <sub>3</sub>	0.84	0.63	0.63	1.20	1.61
RbSnI <sub>3</sub>	0.82	0.52	0.52	0.71	0.82
KSnBr <sub>3</sub>	0.81	0.58	0.58	1.06	-
KSnCl <sub>3</sub>	0.82	0.63	0.63	1.45	-
KSnI <sub>3</sub>	0.81	0.52	0.52	0.83	-
MASnBr <sub>3</sub>	0.94	0.59	1.11	0.67	-
MASnI <sub>3</sub>	0.92	0.52	0.99	0.56	-

## Conclusiones

De la sustitución se lograron 1,512 combinaciones de las que 121 forman perovskitas en ausencia de plomo, que representan el 8.00% del total. Se tiene a la perovskita MAPI con una  $E_{\text{gap}}$  directa de 1.58 eV, y once perovskitas que favorecen el proceso de absorción de fotones en la región luz visible UV-Vis con brechas en el intervalo de 0.52 a 1.46 eV. Se distingue en orden descendente a las mejores, son:  $\text{CsSnI}_3 > \text{MASnI}_3 > \text{RbSnI}_3 > \text{KSnI}_3 > \text{MASnBr}_3 > \text{CsSnBr}_3 > \text{RbSnBr}_3 > \text{CsSnCl}_3 > \text{KSnBr}_3 > \text{RbSnCl}_3 > \text{KSnCl}_3$ . La mejor adsorción en la región UV-Vis la tiene el  $\text{CsSnI}_3$ , y la mejor estabilidad el  $\text{CsSnCl}_3$ . El logro más importante al sustituir el plomo es el utilizar las propiedades optoelectrónicas en el diseño. Y por último, no menos importante es el progreso y el desarrollo debido a la comprensión y el uso de estrategias en los cálculos realizados.

## Agradecimientos

Al CONACYT por el apoyo para la realización de este trabajo. Al Laboratorio de Supercómputo y Visualización en Paralelo, Yoltla, de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Al Área de Física Atómica Molecular Aplicada de la Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco.

## Referencias

- Becker M., Klüner T., Wark M., (2017). Formation of hybrid ABX<sub>3</sub> perovskite compounds for solar cell application: First-principles calculations of effective ionic radii and determination of tolerance factors. *Dalton Trans*, 46.
- Blakers A., et al., (2013). High Efficiency Silicon Solar Cells. *Energy Procedia*, 33: 1–10.
- Blank A., et al., (2018). Conversion characteristics of silicon photovoltaic cells for optical beaming. 42.
- Boix P., et al., (2015). Perovskite Solar Cells: Beyond Methylammonium Lead Iodide. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 6: 150213091342008.
- Fiolhais C., Nogueira F., Marques M., (2003). A Primer in Density Functional Theory. Vol. 620.
- Fitzgerald G. Andzelm J., (1991). Chemical applications of density functional theory: comparison to experiment, Hartree-Fock, and perturbation theory. *The Journal of Physical Chemistry*, 95(26): p. 10531-10534.
- Giorgi, G., et al., (2013). Small Photocarrier Effective Masses Featuring Ambipolar Transport in Methylammonium Lead Iodide Perovskite: A Density Functional Analysis. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 4(24):4213-4216.
- Goldschmidt V.M., (1926). Die Gesetze der Krystallochemie. *Naturwissenschaften*, 14(21):477-485.
- Graetzel M., (2014). The light and shade of perovskite solar cells. *Nature materials*, 13, 838-42.
- Green M.A., et al., (2019), Solar cell efficiency tables (version 54). *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 27(7), 565-575.
- Han G., et al., (2017), Towards high efficiency thin film solar cells. *Progress in Materials Science*, 87,. 246-291.
- Kieslich G., Sun S., Cheetham T., (2015.), An Extended Tolerance Factor Approach for Organic-Inorganic Perovskites. *Chem. Sci.*, 6.
- Körbel S., M.A.L. Marques S. Botti, (2016), Stability and electronic properties of new inorganic perovskites from high-throughput ab initio calculations. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(15), 3157-3167.
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. (1996). Local and Gradient-Corrected Density Functionals, in *Chemical Applications of Density-Functional Theory. American Chemical Society*. 453-462.
- Poortmans J. Arkhipov V. (2006). Thin Film Solar Cells, Fabrication, *Characterization and Applications*. 471.
- Sun G. (2003), Performance of the Vienna ab initio simulation package (VASP) in chemical applications. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 624, 37-45.
- Saliba M., et al., (2016). Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. *Energy & Environmental Science*, 9(6): 1989-1997.
- Song T.-B., et al., (2015). Perovskite solar cells: Film formation and properties. *J. Mater. Chem. A*, 3.
- Suess H.E., V.M., (1988), Goldschmidt and the origin of the elements. *Applied Geochemistry*, 3(4): p. 385-391.
- Tai Q., Tang K.C., Yan F., (2019). Recent progress of inorganic perovskite solar cells. *Energy & Environmental Science*, 12(8): 2375-2405.
- Travis W., G.E.N.K., Bronstein H., Scanlon D.O. Palgrave R. G., (2016). On the application of the tolerance factor to inorganic and hybrid halide perovskites: a revised system†. *Chem. Sci.*, 7: 4548.
- Wang D., et al., (2016), Stability of perovskite solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 147: 255-275.
- Yin W. J., Shi T., Yan Y. (2014), Unique Properties of Halide Perovskites as Possible Origins of the Superior Solar Cell Performance. *Advanced materials (Deerfield Bea, Fla.)*, 26.
- Ye T., et al., (2016), Ultrafast Photogenerated Hole Extraction/Transport Behavior in a  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /Carbon Nanocomposite and Its Application in a Metal-Electrode-Free Solar Cell. *ChemPhysChem*, 17: 4102.